

令和2年度中性子イメージング専門研究会
R03/01/06

機械学習解析による 固液相分率イメージング

加美山 隆¹, 平野 主馬¹, 佐藤 博隆¹, 小野 寛太²,
鈴木 雄太², 伊藤 大介³, 齊藤 泰司³

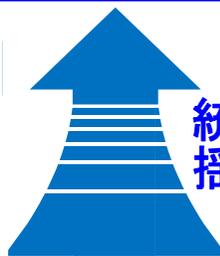
1: 北大、2: KEK、3: 京大

中性子パルスイメージング法による超階層的組織構造情報の可視化

中性子パルスイメージング法

工業製品

マクロな性質



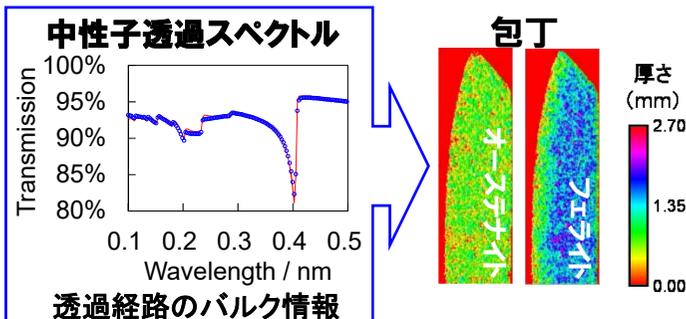
統計的
揺らぎ

ミクロな構造と物性

部品毎の材料

- ← 加工・複数の組合せ・組立により製品の性能を発現
(中性子によるバルク測定)
- ← 素材として利用する特性
- ← マクロに発現する性質に影響
(ピンポイントな測定法)
- ← 材料の基本特性を支配

工業製品を総体として理解するには**ミクロな性質の製品スケールにおけるゆらぎ**の情報が必要(=広視野下のミクロ情報分布)



結晶組織構造情報の広視野マッピング

結晶構造、結晶相、集合組織、
結晶子サイズ、弾性・塑性歪

解析コード「RITS」の開発

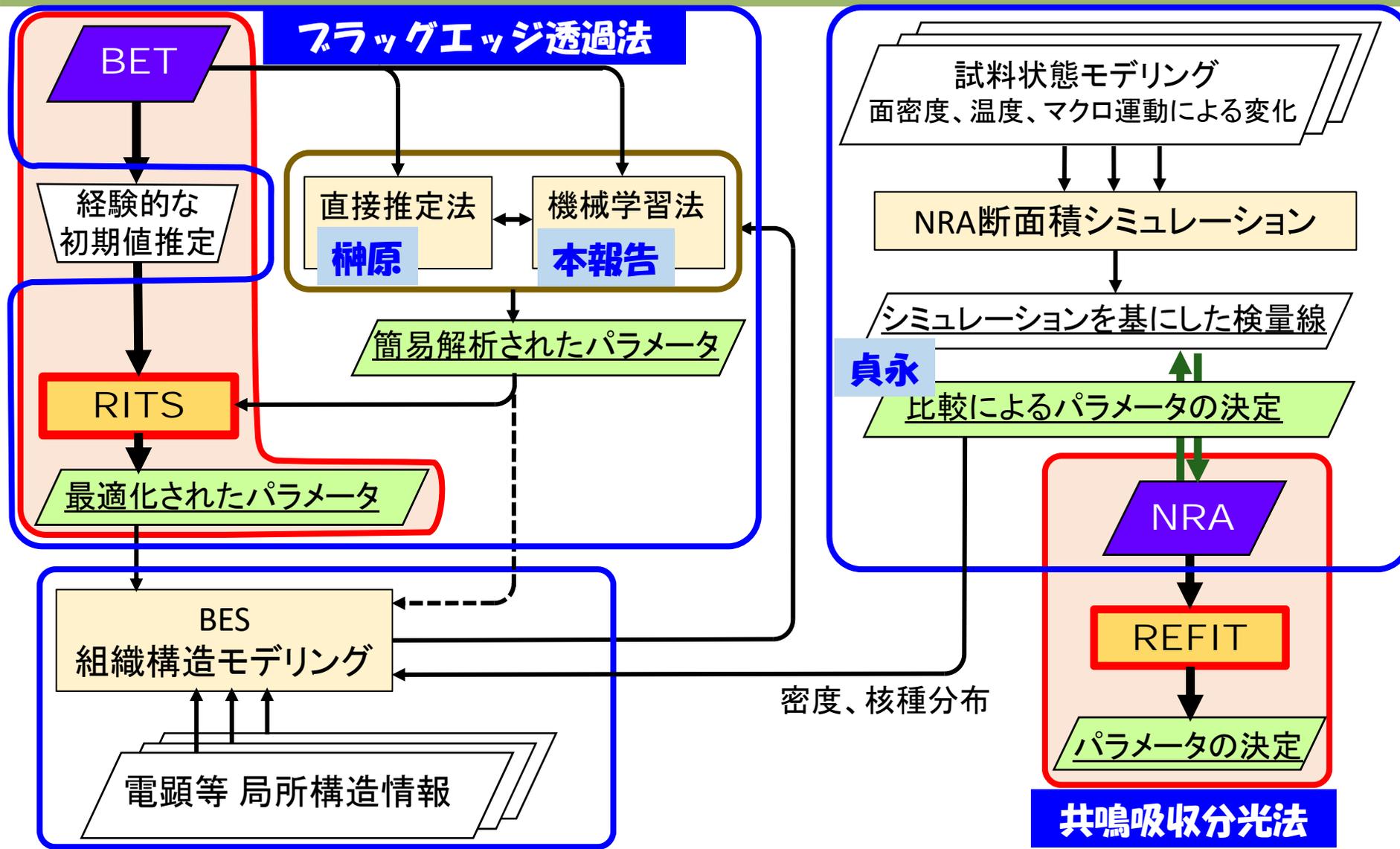
うまく動かすには慣れが要求される。

中性子パルスイメージングの普及には**“ロバストな解析方法”**が必要

「誰」が「どこの施設」のデータを解析しても「同じ結果」が「許容できる精度」で得られる。

藤谷

北大が取り組むロバストな透過スペクトル解析



(1) 機械学習を援用した 固液相分率解析法の性能評価

機械学習法による固液相分率解析の導入

中性子透過実験によるPb-Bi共晶合金(LBE)の凝固過程追跡

- 課題
- ・RG画像からは固液共存域を定量的に決めるのは困難。
 - ・ピクセルのスペクトル解析では結晶組織が多種多様で最適化が困難。

→ 機械学習により様々な凝固組織を考慮した相分率解析が行えないか。

1. 凝固過程のLBEの波長分析型中性子イメージング実験

液相100%
固相100%

} それぞれの中性子透過率スペクトルも実験で取得しておく

→ 計算により各相分率(0~100%)の学習用中性子透過率スペクトルを作成

↓

2. 主成分分析によるスペクトルの次元(データ点数)削減

↓

3. 教師あり機械学習法で機械学習モデルを構築

↓

4. 実験の固液混合領域の固液相分率を解析

機械学習法の解析性能評価の流れ

① 中性子透過率スペクトルの作成

固相・液相のLBEを利用して固液混合のスペクトルを作成(固相分率0, 1, ..., 99, 100%)

※固相の種類(17種類) = 等方的な組織(1種) + 配向組織(16種)

合計: 1701種類

結晶配向ベクトル(4種) × 配向組織の発達度合い(MD: 4種)

② 作成したスペクトル群を訓練データ、解析データに分割して解析

※訓練データは1500本、解析データは201本とした。

訓練データを学習させ機械学習モデルを構築し、解析を実行

- (1) 主成分分析(PCA)を利用してスペクトルのデータ点数(次元)削減
統計誤差の影響および、教師あり機械学習法の計算コストを下げるために行う。
- (2) 教師あり機械学習法(K最近傍法, KNN)を用いてテスト解析

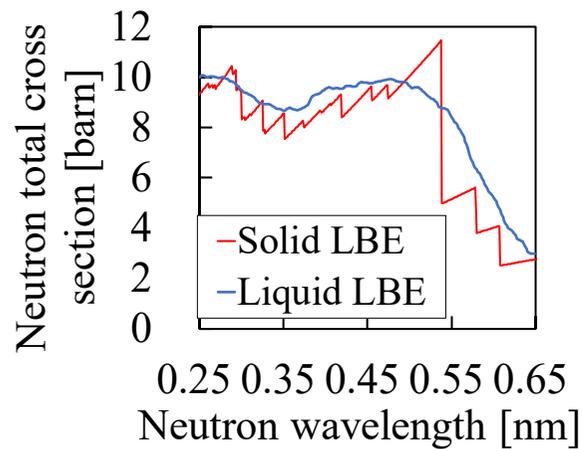
③ 解析結果とスペクトル群作成時に設定した固相分率との差を平均平方二乗誤差(RMSE)で評価

→ 解析性能の評価

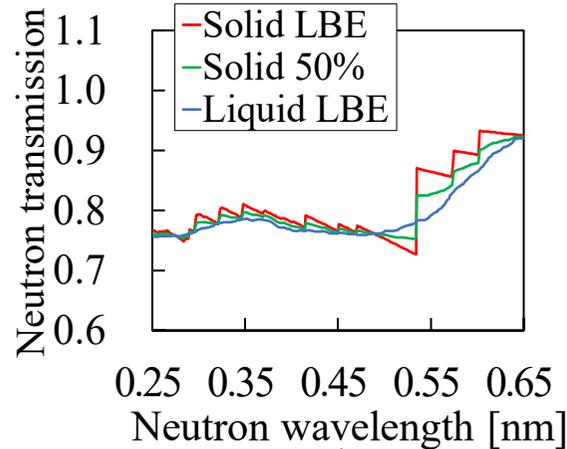
解析テストに使用する中性子透過率スペクトル

Pb-Bi共晶合金(LBE)について相分率や統計誤差が異なる多種のスペクトルを作成

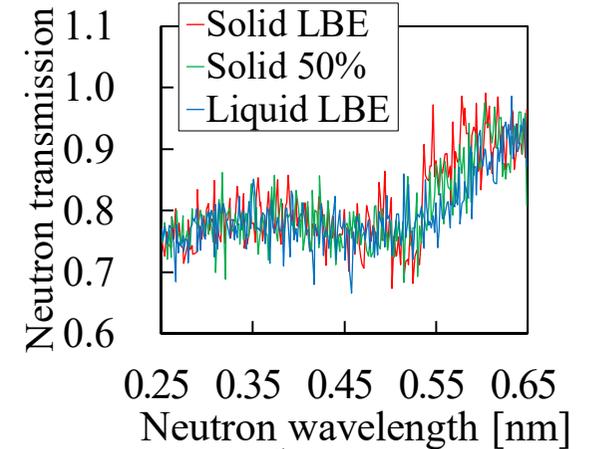
巨視的中性子全断面積スペクトル



中性子透過率スペクトル



中性子透過率スペクトル



巨視的中性子全断面積

LBE固体の断面積

・RITS※1によるシミュレーション
(MD=0.6~1.0, 結晶配向ベクトル4種)

LBE液体の断面積

・実験から取得

相分率

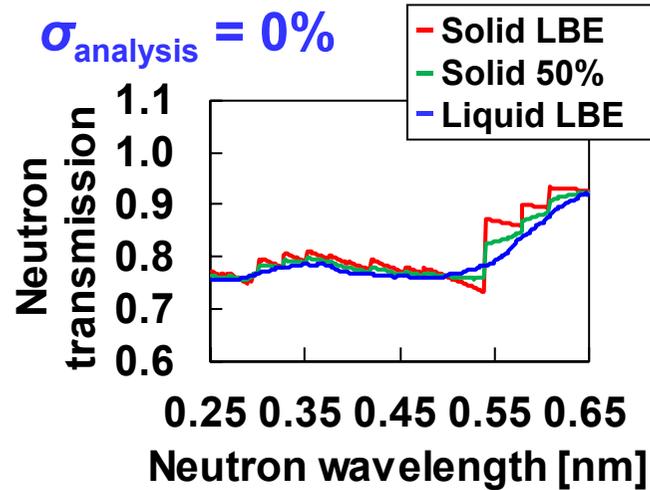
101種類(0~100%)

統計誤差

11種類(σ : 0~10%)

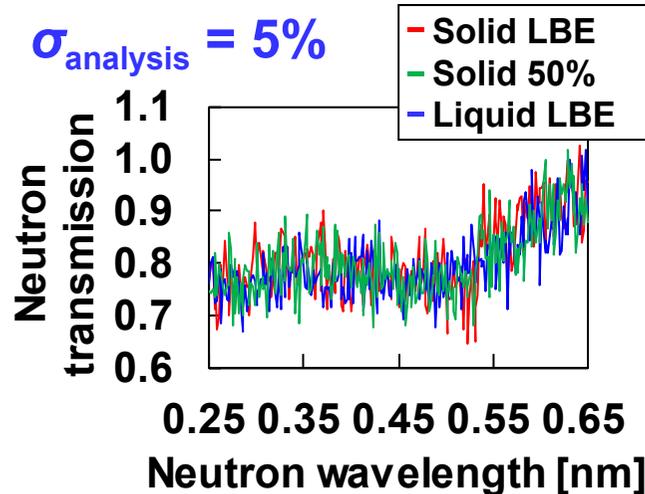
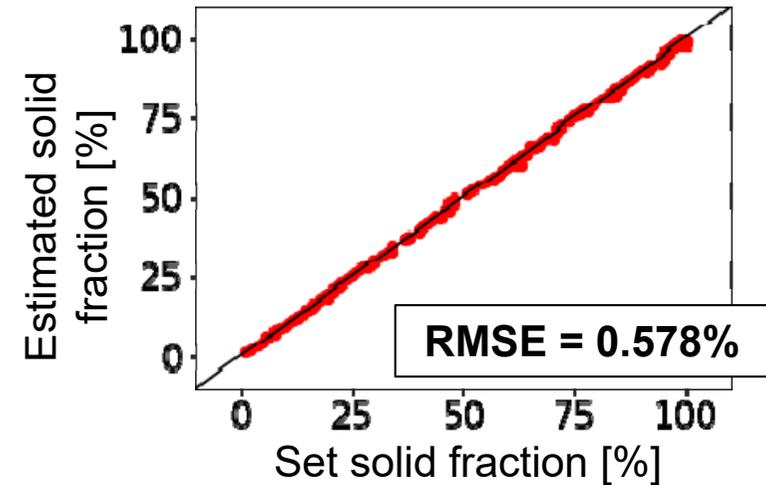
※1 中性子全断面積シミュレーションコードRITS

訓練データ ($\sigma_{\text{train}} = 0\%$) を利用した際のテスト解析



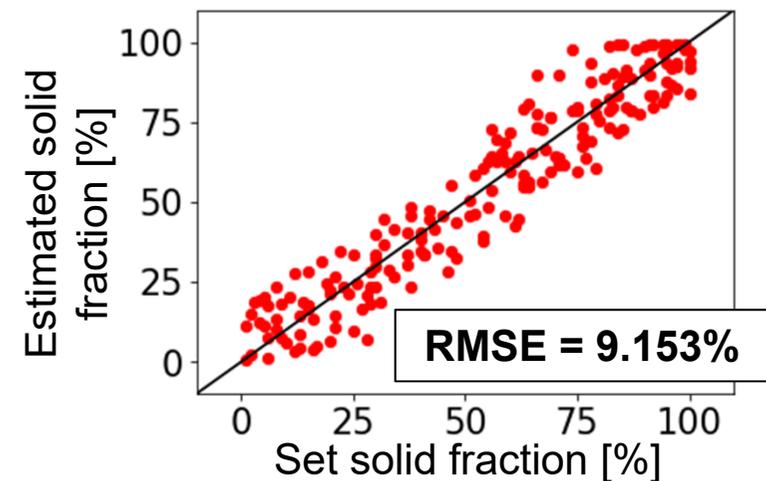
機械学習法で解析

解析データ
201種類



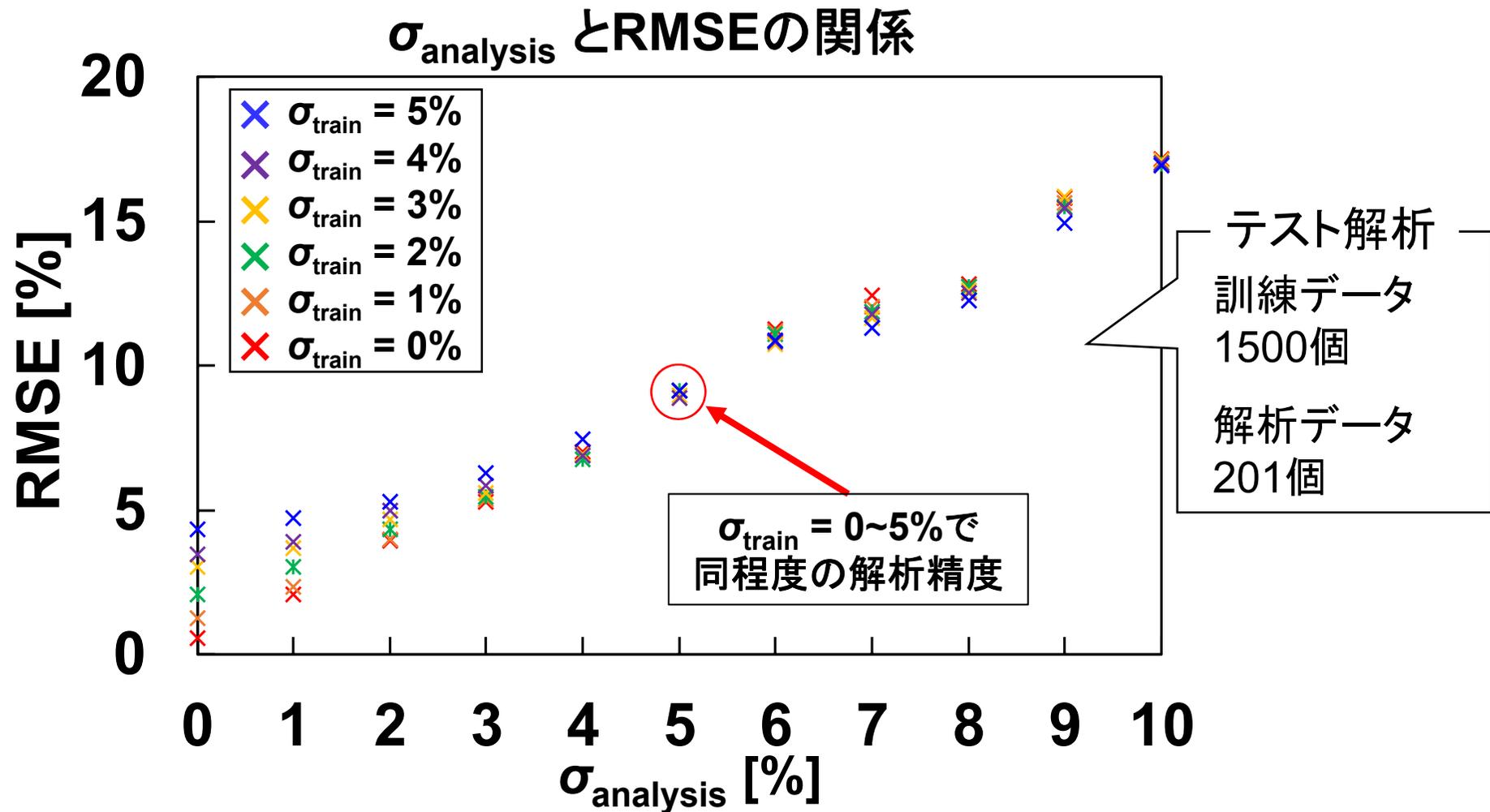
機械学習法で解析

解析データ
201種類



統計誤差が含まれない解析データは高精度で解析でき、
統計誤差が含まれる解析データでは解析精度が低下する

訓練・解析データ両方に統計誤差が含まれる場合のテスト解析



学習データに含まれる統計誤差が解析対象のデータに含まれる統計誤差と同程度以内であれば、解析性能は低下しない。
～学習データを統計精度よく取得すべき

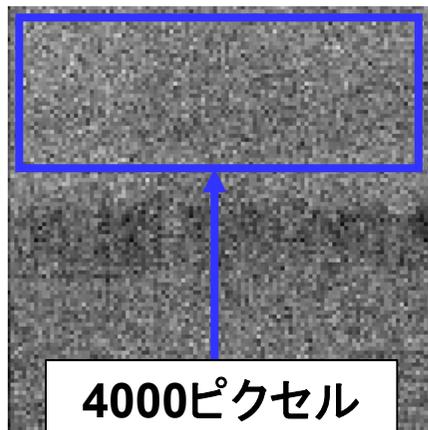
(2) 機械学習法による凝固中LBE実験データの固液相分率解析・イメージング

実験データを利用した機械学習モデルの構築

訓練用データ(PCAで3次元に次元削減したデータ)をもとに機械学習モデルを構築

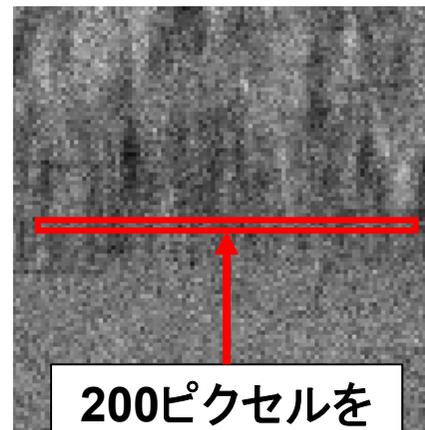
訓練用データ(5001種類)

100%液相と判断した領域
のイメージング



4000ピクセル
を平均

全凝固後(固相100%)
のイメージング



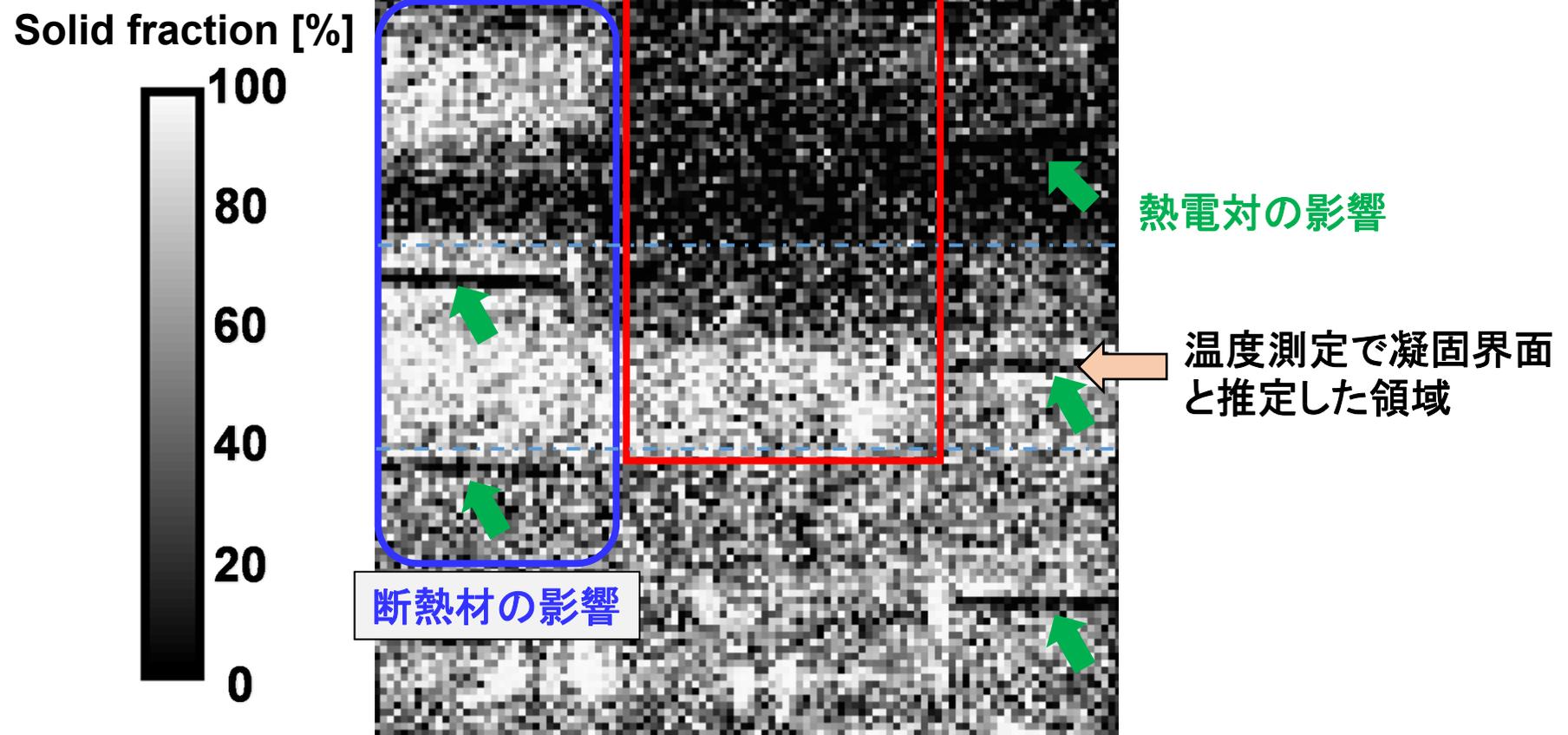
200ピクセルを
平均

試料の位置ごとに
複数サンプリング
(50種類)

これらのデータから各相分率(0~100%)の
中性子透過率スペクトルを作成し、機械学習の訓練データとした。

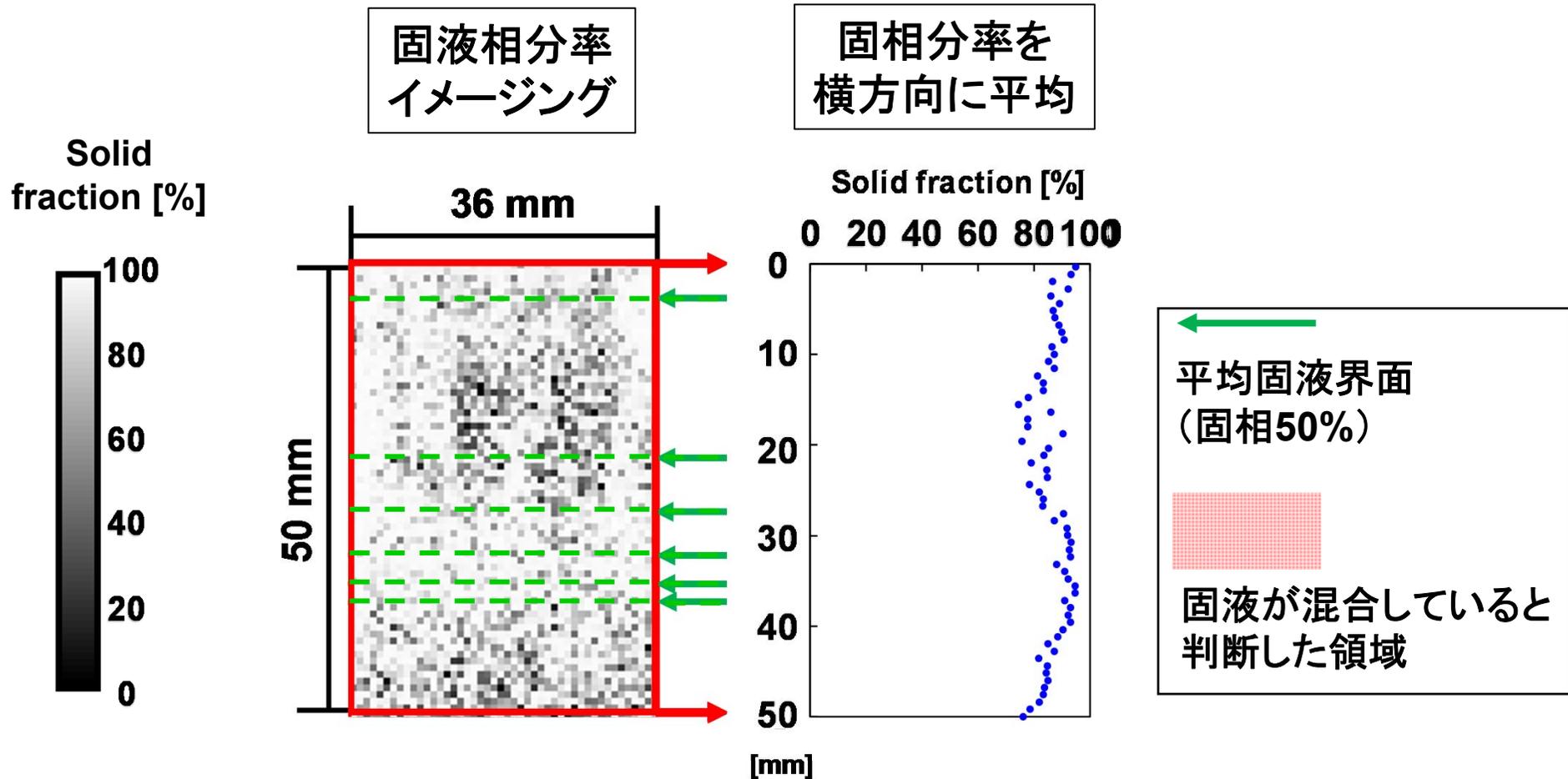
一次元凝固中のLBEの分光イメージングへの機械学習法の適用

固液相分率イメージング



熱電対や断熱材の影響が少ないと判断した領域を利用して
以後のデータ(凝固界面が上昇中のデータ)解析を実施。

機械学習法による固液相分率マップの時間変化

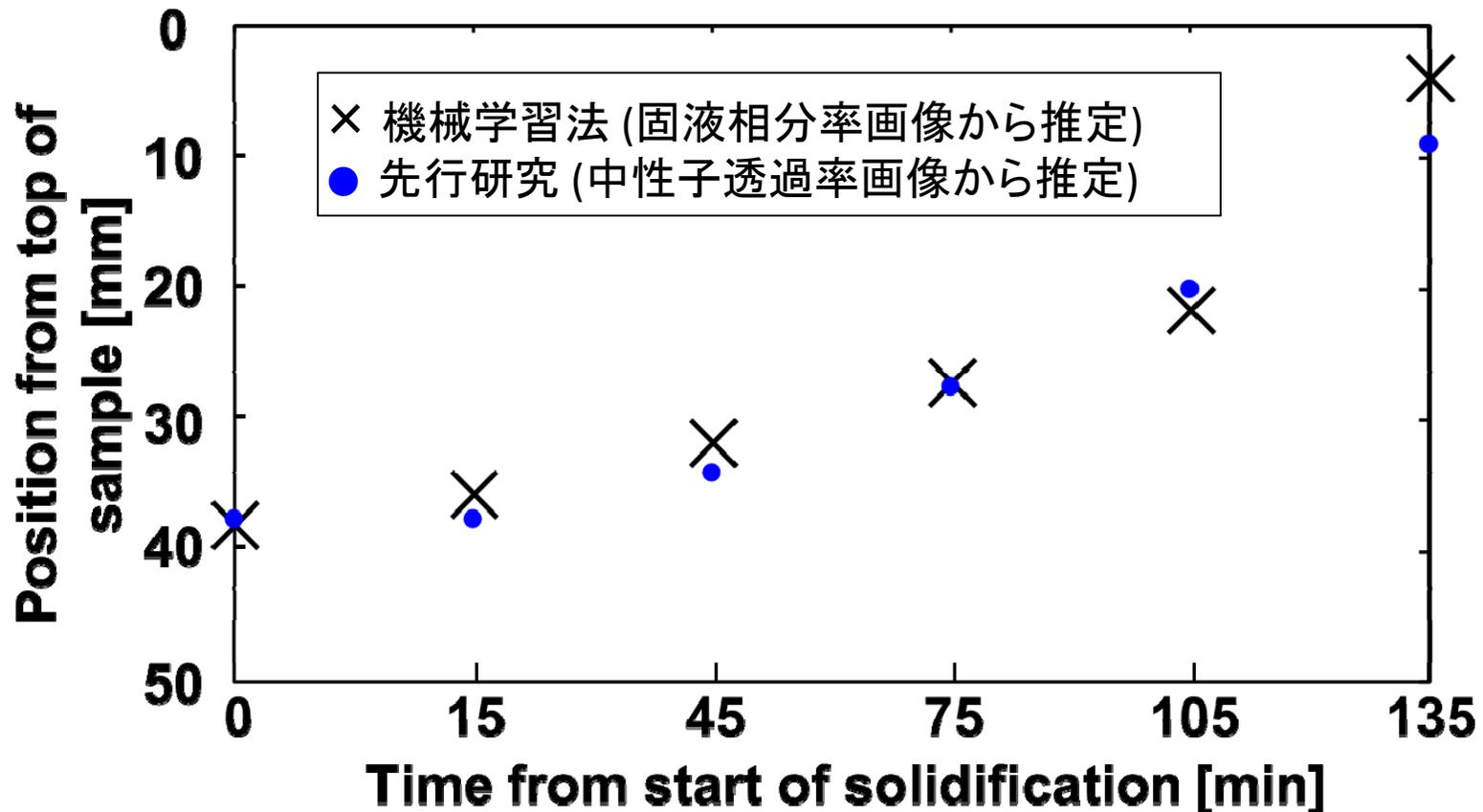


※ 30分/撮影

時間とともに凝固界面が上昇する様子が、固液相分率イメージングから確認された。

固液相分率イメージングを利用した凝固界面の位置の推定

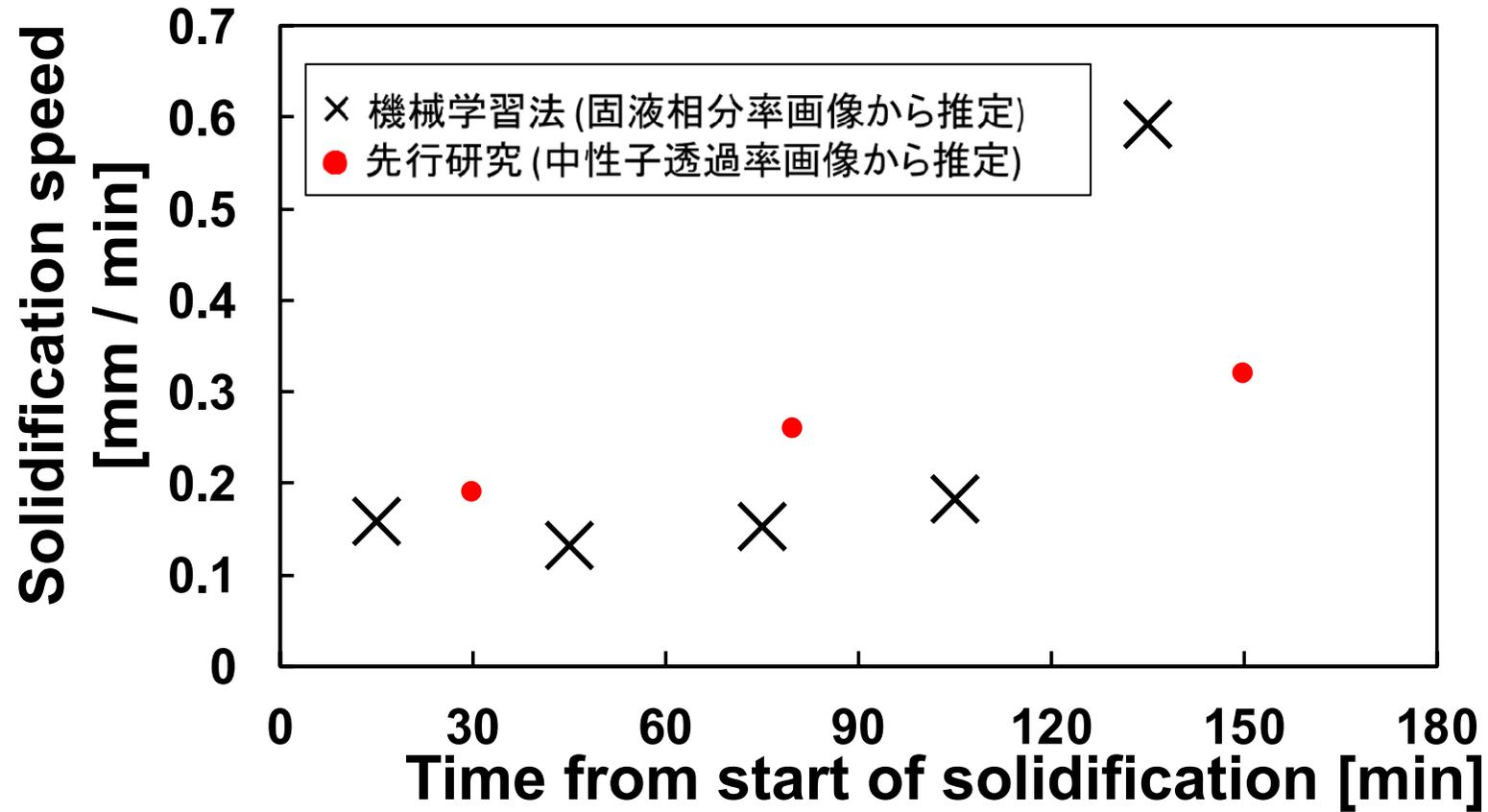
凝固界面の上昇開始からの時間と平均固液界面の位置との関係



中性子透過率画像ではなく、固液相分率画像から凝固界面の上昇が推定された。

凝固界面の位置の推定結果から算出した界面の移動速度

凝固界面の上昇開始からの時間と界面の移動速度との関係



固液相分率画像から凝固界面の移動速度を推定した結果、時間経過につれて界面上昇が速くなる傾向がみられた。

まとめ

内容

凝固中のLBEに対して機械学習法を利用した固液相分率解析を適用。

多種多様な組織を持つ結晶が析出する固相に対しては、学習データを固相の実測値から取得。

結果

- ・透過スペクトルから機械学習法で固液相分率を得ることに成功。
- ・実測の学習データは少なくとも解析データと同程度の統計が必要。

まとめ

機械学習法は大量のデータ解析が必要となる透過分光イメージングの解析に利用できる可能性を示した。
ブラッグエッジ解析への適用を検討中。